1次元 Random 格子内に入射した平面波の減衰

芝浦工大　広　田　　徹

（７月３日受理）

§１　序

Rubin[1] は昨年秋の統計力学国際会議で１次元の Random 同位原子格子に外から平面波を送り込むと，それは指数函数的に減衰することを示した。又，堀[2] は Phase Theory を使用し，このことが，固有モードの局在性と密接に結びついていることを論じた。このノートでは１次元の Random 格子系（電子系，振動子系）に入射した平面波が，必ず減衰することを別の方法で厳密に証明する。方法は，Random Matrix をその中に含まれる Random パラメーターで平均した Matrix を使用する。通常 Random 系のスペクトル等における微細構造[3] はこのような平均操作では求められないが，完全に入射平面波が減衰する体系では振幅の間の２次関係を使用すれば，平均操作から，任意の Random 格子に対する結論を引き出す事が出来る。

§２　２次形及減衰条件

次のように Transfer Matrix で記述される１次元の Random 系を考える。

$$\begin{pmatrix} A_{j+1} \\ B_{j+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_j \\ B_j \end{pmatrix} \tag{2-1}$$

上式の左辺は $j+1$ 番目の格子点で定義されるベクトルであり，(T) は j 番目と $j+1$ 番目の格子点について決まる Random パラメーターの函数である。（A_j，B_j は j 番目の格子点の右側に於ける進行波，後退波の振幅を夫々表わす。）通常，次の関係が成立していると考えてよい。

$$T_{11} = T_{22}^{*},\quad T_{12} = T_{21}^{*},\quad T_{11}T_{22} - T_{12}T_{21} = 1 \tag{2-2}$$

（Unimodular 条件）

さて，１次関係（2−1）より，２次関係を作る。

$$\begin{pmatrix} |A_{j+1}|^2 \\ A_{j+1}B_{j+1}^{*} \\ A_{j+1}^{*}\,B_{j+1} \\ |B_{j+1}|^2 \end{pmatrix} = (M(j+1,\,j)) \begin{pmatrix} |A_j|^2 \\ A_jB_j^{*} \\ A_j^{*}B_j \\ |B_j|^2 \end{pmatrix} \qquad (2\text{-}3)$$

（$M(j+1,\ j)$）は４行４列の行列であり，$j+1$ 番目の格子点と j 番目の格子点で決まる Random パラメーターに依存する。（2−2）を考慮するならば（2−3）より

$$|A_{j+1}|^2-|B_{j+1}|^2=|A_j|^2-|B_j|^2 \qquad (2\text{-}4)$$

が成立していることがわかる。これは Flux の保存式である。

さて左側から平面波が x_1 の点（１番目の格子点）に入射して，右側へ x_N の点で通り抜けるとする。（2−3）より

$$\begin{pmatrix} |A_N|^2 \\ A_NB_N^{*} \\ A_N^{*}B_N \\ |B_N|^2 \end{pmatrix} = M(N,N-1)\,M(N-1,N-2)\cdots\cdots M(1,0) \begin{pmatrix} |A_0|^2 \\ A_0B_0^{*} \\ A_0^{*}B_0 \\ |B_0|^2 \end{pmatrix} \qquad (2\text{-}5)$$

マトリックス（M）内の Random パラメーターが分布函数により支配されるとしよう。この Random パラメーターに，分布に従つて可能な値をとらせ，平均すると $|A_N|^2$，$|B_N|^2$ は必ず正値を示す事は明らかであるから，もし

$$\lim_{N\to\infty} <|A_N|^2> \to 0\,,\qquad \lim_{N\to\infty} <|B_N|^2> \to 0 \qquad (2\text{-}6)$$

であれば，Random パラメーターの任意の組，即ち任意の Random chain に対し

$$\lim_{N\to\infty} |A_N|^2 \to 0, \qquad \lim_{N\to\infty} |B_N|^2 \to 0 \tag{2-7}$$

が成立することになる。今の場合，波が x_N の右側に抜けるのであるから，$B_N = 0$ が常に成立している。従つて $B_N = 0$ の場合

$$\lim_{N\to\infty} \overline{<|A_N|^2>} \to 0 \tag{2-8}$$

であれば，入射波は任意の Random Chain に対し，必ず減衰することになる。上で $\overline{<\quad>}$ は Random パラメーターが2つとし，その両者についての平均を表わすものとする。

Random パラメーターについて平均したマトリックス $<\overline{M}>$ を相似変換で対角化し，その固有値を，$\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4$ とする。

$$<\overline{M}><\overline{M}><\overline{M}> \ <\overline{M}> = UU^{-1}<\overline{M}>UU^{-1}<\overline{M}> \cdots <\overline{M}>UU^{-1}$$

$$= U\begin{pmatrix} \lambda_1^N & & & 0 \\ & \lambda_2^N & & \\ & & \lambda_3^N & \\ 0 & & & \lambda_4^N \end{pmatrix}U^{-1} \tag{2-9}$$

$$U \equiv \begin{pmatrix} x_1 & y_1 & z_1 & w_1 \\ x_2 & y_2 & z_2 & w_2 \\ x_3 & y_3 & z_3 & w_3 \\ x_4 & y_4 & z_4 & w_4 \end{pmatrix} \qquad U^{-1} \equiv \begin{pmatrix} x_1' & x_2' & x_3' & x_4' \\ y_1' & y_2' & y_3' & y_4' \\ z_1' & z_2' & z_3' & z_4' \\ w_1' & w_2' & w_3' & w_4' \end{pmatrix} \tag{2-10}$$

と変形出来る。但し (x_n)，(y_n)，(z_n)，(w_n) は夫々固有値 $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4$ に対する固有ベクトルであり，又 U^{-1} の成分は $UU^{-1} = I$（I：単位マトリックス）から決められる。従つて

$$\begin{pmatrix} \overline{<|A_N|^2>} \\ \overline{<A_N B_N^*>} \\ \overline{<A_N^* B_N>} \\ \overline{<|B_N|^2>} \end{pmatrix} = (<\overline{M}>)^N \begin{pmatrix} |A_0|^2 \\ A_0 B_0^* \\ A_0^* B_0 \\ |B_0|^2 \end{pmatrix}$$

$$= U\begin{pmatrix} \lambda_1^N & & & 0 \\ & \lambda_2^N & & \\ & & \lambda_3^N & \\ 0 & & & \lambda_4^N \end{pmatrix} U^{-1} \begin{pmatrix} |A_0|^2 \\ A_0 B_0^* \\ A_0^* B_0 \\ |B_0|^2 \end{pmatrix} \tag{2-11}$$

であるから，

$$\begin{aligned} <\overline{|A_N|^2}> &= P_{11}\lambda_1^N + P_{12}\lambda_2^N + P_{13}\lambda_3^N + P_{14}\lambda_4^N \\ <\overline{A_N B_N^*}> &= P_{21}\lambda_1^N + P_{22}\lambda_2^N + P_{23}\lambda_3^N + P_{24}\lambda_4^N = 0 \\ <\overline{A_N^* B_N}> &= P_{31}\lambda_1^N + P_{32}\lambda_2^N + P_{33}\lambda_3^N + P_{34}\lambda_4^N = 0 \\ <\overline{|B_N|^2}> &= P_{41}\lambda_1^N + P_{42}\lambda_2^N + P_{43}\lambda_3^N + P_{44}\lambda_4^N = 0 \end{aligned} \tag{2-12}$$

の形に２次式の平均を書く事が出来る。§４および§５で示すように，この論文で考える Random 系のモデルに対してはマトリックス $<\overline{M}>$ の固有値 $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4$ の中で１根が１より大きく（これを λ_1 とする。）１根が１に等しく（これを λ_2 とする。）他の２根の絶対値は１より小になる。以下このことを仮定する。$N\to\infty$ の場合（2-12）の後の３式が成立する為には，λ_3, λ_4 の絶対値は１より小であるから

$$\begin{aligned} &P_{21}\lambda_1^N + P_{22} \to 0, \quad P_{31}\lambda_1^N + P_{32} \to 0 \\ &P_{41}\lambda_1^N + P_{42} \to 0 \end{aligned} \tag{2-13}$$

でなければならない。上式が成立する為には

$$\frac{P_{22}}{P_{21}} = \frac{P_{32}}{P_{31}} = \frac{P_{42}}{P_{41}} = -\lambda_1^N \tag{2-14}$$

となる。更に $\lim_{N\to\infty} B_N = 0$ である為には $N\to\infty$ の場合 λ_2^N の係数も亦０にならなければならない。従つて

$$\Delta_1' = x_1'|A_0|^2 + y_1' A_0 B_0^{*} + z_1' A_0^{*} B_0 + w_1'|B_0|^2 = 0$$
$$\Delta_2' = x_2'|A_0|^2 + y_2' A_0 B_0^{*} + z_2' A_0 B_0^{*} + w_2'|B_0|^2 = 0 \qquad (2\text{–}15)$$

が必要となる。上の2式は A_0, B_0 を決める。この式の意味を見る為にマトリックスU及びU^{-1}の成分を調べる。条件（2−2）より平均マトリックス$\overline{M}$の成分について次の関係式が成立することがわかる。

$$M_{11} - M_{41} = 1\ , \quad M_{14} - M_{44} = -1$$
$$M_{12} = M_{42}\ , \quad M_{13} = M_{43} \qquad (2\text{–}16)$$

又
$$M_{22}^{*} = M_{33}, \qquad M_{23}^{*} = M_{32}$$
$$M_{21}^{*} = M_{31}, \qquad M_{24}^{*} = M_{34} \qquad (2\text{–}17)$$

$\overline{M}$に対する固有値方程式と（2−16）より

$$(1-\lambda_1)(x_1-x_4) = (1-\lambda_2)(y_1-y_4) = (1-\lambda_3)(z_1-z_4)$$
$$= (1-\lambda_4)(w_1-w_4) \qquad (2\text{–}18)$$

の式が得られる。$\lambda_2 = 1$，その外の固有値は0ではないので

$$x_1 = x_4, \quad z_1 = z_4, \quad w_1 = w_4 \qquad (2\text{–}19)$$

となる。従つて

$$\begin{vmatrix} x_1 & y_1 & z_1 & w_1 \\ x_2 & y_2 & z_2 & w_2 \\ x_3 & y_3 & z_3 & w_3 \\ x_4 & y_4 & z_4 & w_4 \end{vmatrix} = (y_4 - y_1) \begin{vmatrix} x_1 & z_1 & w_1 \\ x_2 & z_2 & w_2 \\ x_3 & z_3 & w_3 \end{vmatrix} \qquad (2\text{–}20)$$

$$y_1' = \frac{1}{y_4 - y_1}, \quad y_2' = 0\ , \quad y_3' = 0\ , \quad y_4' = -\frac{1}{y_4 - y_1} \qquad (2\text{–}21)$$

となり，（2－15）の第2の式は

$$|A_0|^2 = |B_0|^2 \qquad （完全減衰） \qquad (2\text{–}22)$$

を意味する。又第1の式は B_0 の位相を決めるものである。

§3　透過係数及減衰

有限の長さの Random chain （ N＝有限 ）に対し，透過係数を求め，又 $N\to\infty$ に対し侵入率を計算する。（2－12）を次のように書換える。

$$\begin{aligned}
\langle\overline{|A_N|^2}\rangle &= q_{11}|A_0|^2+q_{12}A_0B_0^{*}+q_{13}A_0^{*}B_0+q_{14}|B_0|^2\\
\langle\overline{A_NB_N^{*}}\rangle &= q_{21}|A_0|^2+q_{22}A_0B_0^{*}+q_{23}A_0^{*}B_0+q_{24}|B_0|^2\\
\langle\overline{A_N^{*}B_N}\rangle &= q_{31}|A_0|^2+q_{32}A_0B_0^{*}+q_{33}A_0^{*}B_0+q_{34}|B_0|^2\\
\langle\overline{|B_N|^2}\rangle &= q_{41}|A_0|^2+q_{42}A_0B_0^{*}+q_{43}A_0^{*}B_0+q_{44}|B_0|^2
\end{aligned} \qquad (3\text{–}1)$$

ここで

$$q_{ij} \equiv x_i x_j' \lambda_1^N + y_i y_j' \lambda_2^N + z_i z_j' \lambda_3^N + w_i w_j' \lambda_4^N \qquad (3\text{–}2)$$

$$(i, j = 1, 2, 3, 4)$$

（3－1）を $|A_0|^2$, $A_0B_0^{*}$, $A_0^{*}B_0$, $|B_0|^2$ に対する連立方程式と考え，$|A_0|^2$ について解くと，（3－2）を使つて

$$\begin{bmatrix} q_{11} & q_{12} & q_{13} & q_{14}\\ q_{21} & q_{22} & q_{23} & q_{24}\\ q_{31} & q_{32} & q_{33} & q_{34}\\ q_{41} & q_{42} & q_{43} & q_{44}\end{bmatrix} = (\lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4)^N \begin{bmatrix} x_1 & y_1 & z_1 & w_1\\ x_2 & y_2 & z_2 & w_2\\ x_3 & y_3 & z_3 & w_3\\ x_4 & y_4 & z_4 & w_4\end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1' & y_1' & z_1' & w_1'\\ x_2' & y_2' & z_2' & w_2'\\ x_3' & y_3' & z_3' & w_3'\\ x_4' & y_4' & z_4' & w_4'\end{bmatrix} \qquad (3\text{–}3)$$

q の行列式で q_{11} の餘因数

$$
= (\lambda_1\lambda_2\lambda_3)^N \begin{vmatrix} x_2 & y_2 & z_2 \\ x_3 & y_3 & z_3 \\ x_4 & y_4 & z_4 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} x_2' & y_2' & z_2' \\ x_3' & y_3' & z_3' \\ x_4' & y_4' & z_4' \end{vmatrix} + (\lambda_1\lambda_2\lambda_4)^N
$$

$$
\times \begin{vmatrix} x_2 & y_2 & w_2 \\ x_3 & y_3 & w_3 \\ x_4 & y_4 & w_4 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} x_2' & y_2' & w_2' \\ x_3' & y_3' & w_3' \\ x_4' & y_4' & w_4' \end{vmatrix} + (\lambda_1\lambda_3\lambda_4)^N \begin{vmatrix} x_2 & z_2 & w_2 \\ x_3 & z_3 & w_3 \\ x_4 & z_4 & w_4 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} x_2' & z_2' & w_2' \\ x_3' & z_3' & w_3' \\ x_4' & z_4' & w_4' \end{vmatrix}
$$

$$
+ (\lambda_2\lambda_3\lambda_4)^N \begin{vmatrix} y_2 & z_2 & w_2 \\ y_3 & z_3 & w_3 \\ y_4 & z_4 & w_4 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} y_2' & z_2' & w_2' \\ y_3' & z_3' & w_3' \\ y_4' & z_4' & w_4' \end{vmatrix} \qquad (3\text{—}4)
$$

となる故

$$
\frac{\overline{<|A_N|^2>}}{|A_0|^2} = \frac{\xi_{1234}\xi'_{1234}(\lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4)^N}{\xi_{123}\xi'_{123}(\lambda_1\lambda_2\lambda_3)^N + \xi_{124}\xi'_{124}(\lambda_1\lambda_2\lambda_4)^N + \xi_{134}\xi'_{134}(\lambda_1\lambda_3\lambda_4)^N + \xi_{234}\,\xi_{234}(\lambda_2\lambda_3\lambda_4)^N} \qquad (3\text{—}5)
$$

と表わす事が出来る。但し

$$
\xi_{1234} \equiv \begin{vmatrix} x_1 & y_1 & z_1 & w_1 \\ x_2 & y_2 & z_2 & w_2 \\ x_3 & y_3 & z_3 & w_3 \\ x_4 & y_4 & z_4 & w_4 \end{vmatrix} \qquad \xi'_{1234} \equiv \begin{vmatrix} x_1' & y_1' & z_1' & w_1' \\ x_2' & y_2' & z_2' & w_2' \\ x_3' & y_3' & z_3' & w_3' \\ x_4' & y_4' & z_4' & w_4' \end{vmatrix} \qquad (3\text{—}6)
$$

$$\xi_{123} \equiv \begin{vmatrix} x_2 & y_2 & z_2 \\ x_3 & y_3 & z_3 \\ x_4 & y_4 & z_4 \end{vmatrix} \qquad \xi'_{123} \equiv \begin{vmatrix} x'_2 & y'_2 & z'_2 \\ x'_3 & y'_3 & z'_3 \\ x'_4 & y'_4 & z'_4 \end{vmatrix}$$

$$\xi_{124} \equiv \begin{vmatrix} x_2 & y_2 & w_2 \\ x_3 & y_3 & w_3 \\ x_4 & y_4 & w_4 \end{vmatrix} \qquad \xi'_{124} \equiv \begin{vmatrix} x'_2 & y'_2 & w'_2 \\ x'_3 & y'_3 & w'_3 \\ x'_4 & y'_4 & w'_4 \end{vmatrix} \tag{3-7}$$

$$\xi_{234} \equiv \begin{vmatrix} y_2 & z_2 & w_2 \\ y_3 & z_3 & w_3 \\ y_4 & z_4 & w_4 \end{vmatrix} \qquad \xi'_{234} \equiv \begin{vmatrix} y'_2 & z'_2 & w'_2 \\ y'_3 & z'_3 & w'_3 \\ y'_4 & z'_4 & w'_4 \end{vmatrix}$$

（３－５）は透過係数に外ならないが，$N\to\infty$ の場合をみてみる。４つの固有値 $\lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4$ の中で λ_1 は１より大，$\lambda_2=1$，λ_3, λ_4 の絶対値の大きさは１より小である故，（３－５）の分母の値は３根の乗積の中で，最大のものによつて決まる。従つて４根の中で最小の根を λ_4 とすると（複素共　の場合は λ_3 と λ_4 ）透過係数は

$$\frac{\langle\overline{|A_N|^2}\rangle}{|A_0|^2} = \frac{\xi_{1234}\xi'_{1234}}{\xi_{123}\xi'_{123}} \times \lambda_4^N \qquad (N\to\infty)$$

$$\left(= \frac{\xi_{1234}\xi'_{1234}}{\xi_{123}\xi'_{123}}\lambda_4^N + \frac{\xi_{1234}\xi'_{1234}}{\xi_{123}\xi'_{134}}\lambda_3^N \right) \tag{3-8}$$

$$(\lambda_3^* = \lambda_4)$$

となり，$N\to\infty$ の場合完全に減衰し，λ_1, λ_2 は減衰に関係しないことが結論される。平面波の Random 格子への侵入率（penetration depth）は

$$\lambda = e^{-\Gamma} \tag{3-9}$$

と置くと

$$\frac{1}{\Gamma} = \frac{1}{\log|\lambda_4|} \tag{3-10}$$

で与えられる。

§4 電 子 系

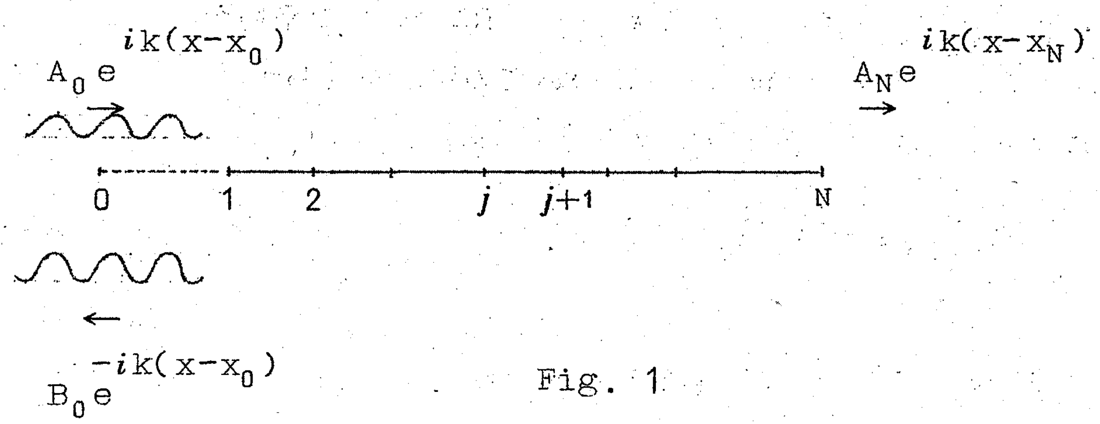

Fig. 1

強さ κ_0 が或る分布に従う δ 函数ポテンシャル群が直線上に，1つの分布で並んだ Random Chain の中の1電子波動函数を考える。i 番目のポテンシャルの位置を x_j とするとき，$x_j \sim x_{j+1}$ の間での波動函数を

$$\varphi_j(x) = A_j e^{ik(x-x_j)} + B_j e^{-ik(x-x_j)} \tag{4-1}$$

とすると，$x = x_j$ に於ける連続性及運動方程式より

$$(T) = \begin{pmatrix} \left(1-\frac{\kappa_0}{i2k}\right)e^{iku}, & -\frac{\kappa_0}{i2k}e^{-iku} \\ \frac{\kappa_0}{i2k}e^{iku}, & \left(1+\frac{\kappa_0}{i2k}\right)e^{-iku} \end{pmatrix}$$

$$u \equiv x_{j+1} - x_j$$

が得られ

2次形式よりマトリックスMを定義すると

$$<M(u)> = \begin{pmatrix} 1-\overline{\beta^2}, & \overline{(1-\beta)\beta}<e^{i2ku}>, & -\overline{(1+\beta)\beta}<e^{-i2ku}>, & \overline{-\beta^2} \\ \overline{(1-\beta)(-\beta)}, & \overline{(1-\beta)^2}<e^{i2ku}>, & \overline{\beta^2}<e^{-i2ku}>, & \overline{-(1-\beta)\beta} \\ \overline{(1+\beta)\beta}, & \overline{\beta^2}<e^{i2ku}>, & \overline{(1+\beta)^2}<e^{-i2ku}>, & \overline{(1+\beta)\beta} \\ \overline{-\beta^2}, & \overline{\beta(1-\beta)}<e^{i2ku}>, & \overline{-\beta(1+\beta)}<e^{-i2ku}>, & 1-\overline{\beta^2} \end{pmatrix} \tag{4-3}$$

となる。

但し，$\beta \equiv \dfrac{\kappa_0}{i2k}$，又 $\overline{(\quad)}$ は κ_0 の分布についての平均を，$<(\quad)>$ はポテンシャルの間の spacing についての平均を表わす。

次にマトリックス $<\overline{M(u)}>$ の固有値方程式

$$\det |M_{ij} - \lambda\delta_{ij}| = 0 \tag{4-4}$$

より

$$\lambda^4 + p\lambda^3 + q\lambda^2 + \gamma\lambda + s = 0$$

と置くと

$$\begin{aligned} P &= -(M_{11} + M_{22} + M_{33} + M_{44}) \\ &= -\{2-2\overline{\beta^2} + \overline{(1-\beta)^2}<e^{i2ku}> + \overline{(1+\beta)^2}<e^{-i2ku}>\} \\ &\equiv -\omega \end{aligned} \tag{4-5}$$

$$\begin{aligned} q &= M_{33}M_{44} - M_{34}M_{43} + M_{22}M_{33} - M_{23}M_{32} + M_{11}M_{22} - M_{12}M_{21} \\ &\quad + M_{11}M_{33} - M_{13}M_{31} + M_{11}M_{44} - M_{14}M_{41} + M_{22}M_{44} - M_{24}M_{42} \\ &= \square_{34} + \square_{23} + \square_{12} + \square_{13} + \square_{14} + \square_{24} \end{aligned} \tag{4-6}$$

$$\square_{34} = (1+2\overline{\beta}+\overline{\beta}\overline{\beta})<e^{-i2ku}>$$

$$\square_{23} = (1+2\overline{\beta^2}-4\overline{\beta}\overline{\beta})<e^{-i2ku}><e^{i2ku}>$$

$$\square_{12} = (1-2\bar{\beta} + \bar{\beta}\,\bar{\beta})\,\langle e^{i2ku}\rangle \tag{4-7}$$

$$\square_{13} = (1+2\bar{\beta} + \bar{\beta}\,\bar{\beta})\,\langle e^{-i2ku}\rangle$$

$$\square_{14} = 1-2\overline{\beta^2}$$

$$\square_{24} = (1-2\bar{\beta} + \bar{\beta}\,\bar{\beta})\,\langle e^{i2ku}\rangle$$

従って

$$\begin{aligned} q = 2\omega-2-\{ & 2(\bar{\beta}\bar{\beta}-\overline{\beta^2})(2-\langle e^{i2ku}\rangle-\langle e^{-i2ku}\rangle) \\ & + 4(\bar{\beta}\bar{\beta}-\overline{\beta^2})\,\langle e^{i2ku}\rangle\langle e^{-i2ku}\rangle \\ & + (1-2\overline{\beta^2})(1-\langle e^{i2ku}\rangle\langle e^{-i2ku}\rangle\} \end{aligned} \tag{4-8}$$

$$\equiv 2\omega-2-\varepsilon_1, \qquad \varepsilon_1 \geq 0$$

$$\left(\bar{\beta}\bar{\beta}-\overline{\beta^2} = -\frac{1}{4k^2}(\bar{\kappa}_0\bar{\kappa}_0-\overline{\kappa_0^2}) > 0\right) \tag{4-9}$$

$$= 2\omega-2-\varepsilon_1 \qquad \varepsilon_1 \geq 0$$

$$\gamma = -\begin{vmatrix} M_{22} & M_{23} & M_{24} \\ M_{32} & M_{33} & M_{34} \\ M_{42} & M_{43} & M_{44} \end{vmatrix} - \begin{vmatrix} M_{11} & M_{13} & M_{14} \\ M_{31} & M_{33} & M_{34} \\ M_{41} & M_{43} & M_{44} \end{vmatrix} - \begin{vmatrix} M_{11} & M_{12} & M_{14} \\ M_{21} & M_{22} & M_{24} \\ M_{41} & M_{42} & M_{44} \end{vmatrix} - \begin{vmatrix} M_{11} & M_{12} & M_{13} \\ M_{21} & M_{22} & M_{23} \\ M_{31} & M_{32} & M_{33} \end{vmatrix}$$

$$= -\nabla_{234} - \nabla_{134} - \nabla_{124} - \nabla_{123} \tag{4-10}$$

$$\begin{aligned} \nabla_{234} &= (1+\overline{\beta^2}-2\bar{\beta}\bar{\beta})\,\langle e^{2iku}\rangle\langle e^{-2iku}\rangle \\ \nabla_{134} &= (1+2\bar{\beta}-\overline{\beta^2}+2\bar{\beta}\bar{\beta})\,\langle e^{-2iku}\rangle \\ \nabla_{124} &= (1-2\bar{\beta}+\overline{\beta^2}+2\bar{\beta}\bar{\beta})\,\langle e^{2iku}\rangle \\ \nabla_{123} &= (1-2\bar{\beta}\bar{\beta}+\overline{\beta^2})\,\langle e^{2iku}\rangle\langle e^{-2iku}\rangle \end{aligned} \tag{4-11}$$

$$\gamma = -\left[\omega - \left\{2(\bar{\beta}\bar{\beta}-\bar{\beta}^2)(2-\langle e^{i2ku}\rangle - \langle e^{-i2ku}\rangle)\right.\right.$$
$$+4(\bar{\beta}\bar{\beta}-\bar{\beta}^2)\langle e^{i2ku}\rangle\langle e^{-i2ku}\rangle$$
$$\left.\left.+2(1-\bar{\beta}^2)(1-\langle e^{i2ku}\rangle\langle e^{-i2ku}\rangle)\right\}\right] \tag{4-12}$$
$$= -(\omega-\varepsilon_2), \qquad \varepsilon_2 \geq 0$$

$$s = \det|\overline{\langle M(u)\rangle}| = \langle e^{i2ku}\rangle\langle e^{-i2ku}\rangle \tag{4-13}$$
$$= 1-(1-\langle e^{i2ku}\rangle\langle e^{-i2ku}\rangle) = 1-\varepsilon_3$$
$$\varepsilon_3 \geq 0$$

(4−5)，(4−8)，(4−12)，(4−13) より固有値方程式は

$$F(\lambda) = \lambda^4 - \omega\lambda^3 + (2\omega-2-\varepsilon_1)\lambda^2 - (\omega-\varepsilon_2)\lambda + 1 - \varepsilon_3 = 0 \tag{4-14}$$

となる。ωは

$$\omega = 2-2\bar{\beta}^2 + \overline{(1-\beta)^2}\langle e^{i2ku}\rangle + \overline{(1+\beta)^2}\langle e^{-i2ku}\rangle$$
$$= 4\overline{\langle(\cos ku + i\beta\sin ku)^2\rangle} \tag{4-15}$$

と書く事が出来る。(4−14) より4根の大小関係を調べる。先づ

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon_3 = 0 \quad (\text{週期格子}) \tag{4-16}$$

とすると，4根は

$$\lambda = 1,\ 1,\ e^{\varphi},\ e^{-\varphi} \qquad \cosh\varphi = \frac{\omega-2}{2} \qquad \omega \geq 4$$
$$1,\ 1,\ e^{i\varphi}\ \ e^{-i\varphi} \qquad \cos\varphi = \frac{\omega-2}{2} \quad 0 \leq \omega \leq 4 \tag{4-17}$$

であることに注意しよう。(4−8)，(4−12)，(4−13) より

$$F(1) = -\varepsilon_1 + \varepsilon_2 - \varepsilon_3 = 0 \tag{4-18}$$

が得られる。即ち $\lambda=1$ は1つの根である。
次に

$$F'(1) = -2\varepsilon_1 + \varepsilon_2 = -2(\overline{\beta}\,\overline{\beta}-\overline{\beta^2})(2-\langle e^{i2ku}\rangle - \langle e^{-i2ku}\rangle + 2\langle e^{i2ku}\rangle\langle e^{-i2ku}\rangle) + 2\overline{\beta^2}(1-\langle e^{i2ku}\rangle\langle e^{-i2ku}\rangle) < 0 \tag{4-19}$$

(4−18)(4−19)より，1根 $\lambda=1$ よりも大きい1実根が存在することがわかる。従つて他の2根の絶対値は1より小になり，この2根が複素共役の場合と実根の場合に分れる。このことは(4−13)より4根の積が1より小である事実よりわかる。$\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3 \ll 1$ の場合をみると複素共役根は

$$\lambda = e^{i\varphi},\ e^{-i\varphi},\ \left(\cos\varphi = \frac{\omega-2}{2}\right) \tag{4-20}$$

の近傍にあり，3実根は

$$\lambda = e^{\varphi},\quad e^{-\varphi},\ 1\quad \left(\cosh\varphi = \frac{\omega-2}{2}\right) \tag{4-21}$$

の近傍にある事は明らかである。複素共役な2根は振幅の自乗平均に対し，振動的な振舞を与えるものである。又1より大きい根の存在は或る任意の境界条件で出発した解の振幅が平均して指数的に増大することを示すものであり，今迄に指摘されていた通りである。[4)]

根の大小については§2で仮定した通りになつて居り，従つて入射波は完全減衰する。又その平均侵入度は最小根，或いは複素共役根の絶対値により，決まるが減衰の程度についてはこの両者で大きく異なる。そこで代数方程式(4−4)について，実根及複素共役根の条件を使う。$\varepsilon_1-\varepsilon_2+\varepsilon_3=1$，を使用すると

$$\begin{aligned}&\lambda^4-\omega\lambda^3+(2\omega-2-\varepsilon_1)\lambda^2-(\omega-\varepsilon_2)\lambda+1-\varepsilon_3\\&=(\lambda-1)\left\{\lambda^3-(\omega-1)\lambda^2+(\omega-1-\varepsilon_1)\lambda-(1-\varepsilon_3)\right\}\end{aligned} \tag{4-22}$$

となるので $\omega-1\equiv\omega'$ と置くと，上の括弧内の3次式は

$$\lambda^3 - \omega'\lambda^2 + (\omega' - \varepsilon_1)\lambda - (1 - \varepsilon_3) = 0 \qquad (4\text{—}23)$$

となる。3次方程式の判別式 D＞0，D＜0 により3実根の場合と複素共役根の場合とが区別される。

$$D = \frac{1}{27}\left\{-\frac{\omega'^2}{3} + \omega' - \varepsilon_1\right\}^3 + \frac{1}{4}\left\{-\frac{2}{27}\omega'^3 + \frac{\omega'^2}{3} - \frac{\varepsilon_1}{3}\omega' - (1 - \varepsilon_3)\right\}^2 \qquad (4\text{—}24)$$

$\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3 \ll 1$ の場合を考えよう。上式を $\varepsilon_1, \varepsilon_3$ で展開して，1次迄をとり整理すると

$$D = -\frac{1}{108}(\omega' - 3)^3(\omega' + 1) + \frac{2}{27}\left(\frac{\omega'^2}{3} - \omega'\right)\varepsilon_1 + \frac{1}{2}\left(-\frac{2}{27}\omega'^3 + \frac{\omega'^2}{3} - 1\right)\left(-\frac{\omega'}{3}\varepsilon_1 + \varepsilon_3\right) \qquad (4\text{—}25)$$

となり，$\varepsilon_1 = \varepsilon_3 = 0$ に対しては

$$\begin{aligned} D &> 0, \quad -1 < \omega' < 3 \\ D &< 0, \quad 3 < \omega' \end{aligned} \qquad (4\text{—}26)$$

が得られ，一般には $\omega' = 3$ の近傍で $\varepsilon_1, \varepsilon_3$ の値に応じ微妙な変化をする。

〔D＜0〕

この場合，固有値方程式（4—22）は4実根を持ち，その最小根 λ_4 は ε_1, ε_2, ε_3 の値に殆んど無関係に ω の値が4より大きくなるにつれ，1より離れ小さくなる。従つて禁制帯の中のエネルギー値を持つ電子が週期格子内に入射した場合と同様の減衰の仕方をする。

〔D＞0〕

この場合 λ_4 と λ_3 は互いに複素共役であり，その絶対値の大きさは，Random パラメーター $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3$ に密接に依存し，$\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3 \ll 1$ の時は1より僅かに小さい。

$\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3 \ll 1$ に対し

$$\lambda = (1+\triangle\gamma)e^{i(\varphi+\triangle\varphi)} \tag{4-27}$$

と置き，（4−14）に代入し，$\lambda=e^{i\varphi}$ が $\varepsilon_1=\varepsilon_2=\varepsilon_3=0$ の場合の固有値方程式の根であることを考慮しながら，$\triangle\gamma$，$\triangle\varphi$，ε_1，ε_2，ε_3 の1次迄をとるならば，

$$\begin{aligned} C_1\triangle\gamma - C_2\triangle\varphi &= \varepsilon_1\cos 2\varphi - \varepsilon_2\cos\varphi + \varepsilon_3 \\ C_2\triangle\gamma + C_1\triangle\varphi &= \varepsilon_1\sin 2\varphi - \varepsilon_2\sin\varphi \end{aligned} \tag{4-28}$$

但し

$$\begin{aligned} C_1 &= \{4\cos 4\varphi - 3\omega\cos 3\varphi + 2(2\omega-2)\cos 2\varphi - \omega\cos\varphi\} \\ C_2 &= \{4\sin 4\varphi - 3\omega\sin 3\varphi + 2(2\omega-2)\sin 2\varphi - \omega\sin\varphi\} \end{aligned} \tag{4-29}$$

$\cos\varphi = \dfrac{\omega-2}{2}$ を使用し，上式より $\triangle\gamma$ を求めると

$$\triangle\gamma = \frac{\omega(\omega-4)^2\{-\varepsilon_2+\varepsilon_3(\omega-2)\}}{C_1^{\ 2}+C_2^{\ 2}} \tag{4-30}$$

が得られる。$0<\omega<4$ に対し，明らかに $\triangle\gamma<0$ である。{（4−12）及び（4−13）} 侵入率は

$$\frac{1}{\Gamma} = -\frac{1}{\triangle\gamma} = \frac{g(\omega)}{\varepsilon_2-\varepsilon_3(\omega-2)} \tag{4-31}$$

$$g(\omega) \equiv \frac{C_1^{\ 2}+C_2^{\ 2}}{\omega(\omega-4)} = \frac{-\omega^3-4\omega^2+36\omega+96}{\omega-4} \tag{4-32}$$

$(\omega \neq 4)$

で与えられる。

§5　振動子系

質量mの原子が，バネ常数Kで結ばれている1次元の規則格子内に，質量M（或る分布を持つ。）の不純物を Random に置換して挿入した格子を考える。（バネ常数に変化はないものとする。）

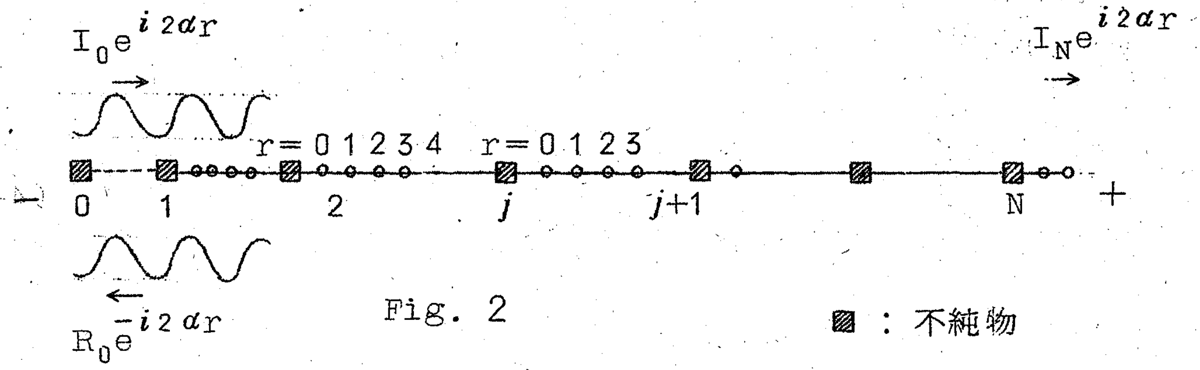

Fig. 2

j番目と $j+1$番目の不純物の間にある原子の変位を

$$X_r = I_j\, e^{i2\alpha r} + R_j\, e^{-i2\alpha r} \tag{5-1}$$

と書くと $j+1$番目と $j+2$番目の不純物の間では

$$X_r = I_{j+1}\, e^{i2\alpha r} + R_{j+1}\, e^{-i2\alpha r} . \tag{5-2}$$

となる。但しrは不純物の位置を r＝0 とし，その右側の原子の位置を順に r＝1, 2, 3, とつけたものである。運動方程式及連続の式より

$$\begin{pmatrix} I_{j+1} \\ R_{j+1} \end{pmatrix} = Q\, Q^{(0)} \cdots\cdots Q^{(0)} \begin{pmatrix} I_j \\ R_j \end{pmatrix} \tag{5-3}$$

が得られる。$Q^{(0)}$, Q は夫々 host 及 impurity 原子の Transfer matri X であり,

$$Q^{(0)} \equiv \begin{pmatrix} e^{i2\alpha} & 0 \\ 0 & e^{-i2\alpha} \end{pmatrix} \tag{5-4}$$

$$Q \equiv \begin{pmatrix} (1+i\mu\tan\alpha)e^{i2\alpha}, & i\mu\tan\alpha\, e^{-i2\alpha} \\ -i\mu\tan\alpha\, e^{i2\alpha}, & (1-i\mu\tan\alpha)e^{-i2\alpha} \end{pmatrix} \qquad (5-5)$$

で定義される。但し α 及び μ は

$$m\Omega^2 = 4K\sin^2\alpha$$

$$\mu = \frac{M-m}{m} \qquad (5-6)$$

で与えられる。ここで Ω は振動数である。すると

$$(Q^{(0)})^{g} Q = \begin{pmatrix} (1+i\mu\tan\alpha)e^{i2\alpha(g+1)}, & i\mu\tan\alpha\, e^{-i2\alpha(g+1)} \\ -i\mu\tan\alpha\, e^{i2\alpha(g+1)}, & (1-i\mu\tan\alpha)e^{-i2\alpha(g+1)} \end{pmatrix}$$

(5-7)

が得られる。ここで μ 及び g を Random パラメーターとすると，電子系と全く同じであることがわかる。即ち

$$i\mu\tan\alpha \longleftrightarrow \frac{\kappa_0}{i2k}, \quad 2\alpha(g+1) \longleftrightarrow ku \qquad (5-8)$$
$$= \beta$$

と対応させてみると，電子系で成立した固有値の性質がそのまま格子系にあてはまる。即ち質量 m の原子から成る linear chain の中に一定の間隔をあけて質量 M_0 の原子を入れた2元原子格子を基礎に考えればよい（M_0 は M の平均），従つて固有値方程式は

$$\lambda^4 - \omega\lambda^3 + (2\omega - 2 - \varepsilon_1)\lambda^2 - (\omega - \varepsilon_2)\lambda + 1 - \varepsilon_3 = 0 \qquad (5-9)$$

$$\omega = 2 - 2\overline{(i\mu\tan\alpha)} + \overline{(1-i\mu\tan\alpha)^2} \langle e^{i2\alpha(g+1)} \rangle_g + \overline{(1+i\mu\tan\alpha)^2} \langle e^{-i2\alpha(g+1)} \rangle_g$$

(5-10)

$$= 4 \left\langle \{ \cos 2\alpha(g+1) - \mu \tan\alpha \sin 2\alpha(g+1) \}^2 \right\rangle$$

となり，4根の中，1つは大きさが1であり，1つは1より絶対値が大きい。又他の2根の絶対値は1より，小さい。（5−10）に於て $\overline{(\qquad)}$ は不純物の質量分布即ちμについての平均であり $\langle\qquad\rangle_g$ は不純物の間にはさまれる原子の数，即ちgについての平均を示している。（g =一定であれば2原子からなる規則格子である。）このようにして電子系で行なつた議論がそのまま格子系についても成立する。即ち入射した平面波は不純物の存在により，完全に減衰する。不純物は質量の違いにより代表されたが，バネの強さKに変化がある場合も同様に入射波の減衰を示すことが出来る。

§6　結　　論

電子系振動子系のどちらの場合でも，解の振幅の二次形を結びつける平均マトリックスを考えると，その固有値の中で必ず絶対値が1より小さい根がありこれが入射平面波の減衰をもたらすのである。この事は Random パラメーターの大小に関係なしに成立する。

最後にいろいろ有益な助言を戴いた堀さんに深く感謝したい。

文　　献

1）R. J. Rubin: J. Phys. Soc Japan, Suppl 26 (1969) 54

2）J. Hori: 1968年統計力学国際会議，Informal Meeting における報告

3）J. Hori: Spectral Properties of Disordered Chains and Lattiees (Pergamon, Press, Oxford, 1968)

P. Dean: Proc. Roy. Soc. A254 (1960) 507

H. Matsuda: Prog. Theor. Phys. 27 (1962) 811; 31 (1964) 161

4）R. E. Borland: Proc. Roy. Soc. 274 (1963) 529

A. P. Roberts & R. E. Makinson: Proc. Phys. Soc. 79 (1962) 630

H. Matsuda: 1968年統計力学国際会議，Informal Meeting における報告